

Взаимосвязь минимумов поверхностной энергии самоиндуцированных наностроек SiGe и их формы

© А.М. Яремко, М.Я. Валах, В.Н. Джаган[†], П.М. Литвин, В.А. Юхимчук

Институт физики полупроводников им. В.Е. Лашкарева Национальной академии наук Украины, 03028 Киев, Украина

(Получена 6 сентября 2005 г. Принята к печати 14 сентября 2005 г.)

Проведен численный расчет влияния компонентного состава, размеров и температурного коэффициента расширения самоиндуцированных наностроек Ge и SiGe, сформированных на кремнии, на величину их полной энергии. Рассмотрена взаимосвязь дискретных минимумов поверхностной энергии наностроек и их формы. Учтено влияние интердиффузионных процессов, существенных при высоких температурах эпитаксии. Результаты расчетов сопоставлены с экспериментальными данными, полученными с помощью атомной силовой микроскопии.

PACS: 61.46.+w, 68.35.-p, 68.37.Ps, 68.47.Fg, 82.60.Av

1. Введение

В последние годы интенсивно исследуются самоиндуцированные наностройки Ge (SiGe), формирующиеся согласно механизма Странского–Крастанова [1] в процессе молекулярно-лучевой эпитаксии (МЛЭ) германия на кремниевой подложке. Интерес к таким объектам стимулируется как фундаментальным аспектом исследования проблем физики нанометровых твердотельных структур, так и перспективой их применения в опто- и нанoeлектронике [2].

Несмотря на большое количество работ, посвященных формированию наностроек, до настоящего времени окончательно не выяснены механизмы, ответственные за формирование их конкретных форм в виде пирамид или куполов [3]. Основываясь на известном теоретическом рассмотрении энергии напряженного островка, развитом в работах [4,5], в данной работе исследована зависимость формы островка от его компонентного состава, величины поверхностной энергии и температурного коэффициента расширения.

2. Теоретическая модель

Анализ АСМ-изображений структур с наностройками, проведенный нами в работах [6,7], показывает, что в зависимости от температуры роста и количества осажденного Ge может наблюдаться как бимодальное, так и одномодовое распределение островков по размерам. Это связано с формированием в процессе МЛЭ островков, имеющих пирамидальную или куполообразную формы (рис. 1). При низких температурах роста ($T_g \leq 550^\circ\text{C}$) и малых количествах осажденного германия $d_{\text{Ge}} \lesssim 8$ монослоев (МС) островки формируются и растут до некоторого объема в форме пирамид с прямоугольным основанием (*hut-klaster*). При номинальной толщине осажденного германия, равной приблизительно

8 МС, происходит переход пирамидальных островков в куполообразные. При более высоких температурах ($T_g > 550^\circ\text{C}$), как правило, островки зарождаются и начинают расти в форме пирамид с квадратным основанием. Анализ АСМ-изображений показал [6,8], что рост пирамидальных островков в этом случае также происходит лишь до некоторого критического объема, а затем они трансформируются в купола за счет возникновения новых боковых граней, образующих больший угол с подложкой по сравнению с пирамидами. Изменения формы островков объяснялись в работе [8] более эффективной релаксацией напряжений в куполообразных островках за счет большего отношения их высоты к латеральным размерам. Однако детальный механизм такого перехода не установлен. Известно, что увеличение температуры эпитаксии приводит к усилению поверхностной диффузии как осаждаемых атомов германия, так и атомов кремния из подложки в островки [6,8]. Как следствие, наблюдается уменьшение поверхностной плотности островков, увеличение их размеров и содержания в них кремния [6,8].

Для разреженного массива островков, когда среднее расстояние между ними велико по сравнению с размером отдельного островка, время миграции атомов по его поверхности значительно меньше, чем время миграции между островками. Поэтому равновесная форма отдельного островка устанавливается быстрее, чем равновесная структура массива островков в целом. Для островка любого объема существует равновесная форма, которая определяется минимумом его полной энергии. При температурах, далеких от температур плавления, равновесная форма кристалла содержит только грани с малой поверхностной энергией. Как правило, это грани с низкими индексами Миллера. Следует отметить, что при зарождении островка уменьшение поверхностной энергии системы островок–подложка может иметь место даже в том случае, когда плоская поверхность осаждаемого материала сама по себе устойчива относительно спонтанного фасетирования, как, например, поверхность (001) InAs [1]. При формировании островка

[†] E-mail: dzhagan@isp.kiev.ua
Fax: +38 044 525 85 50

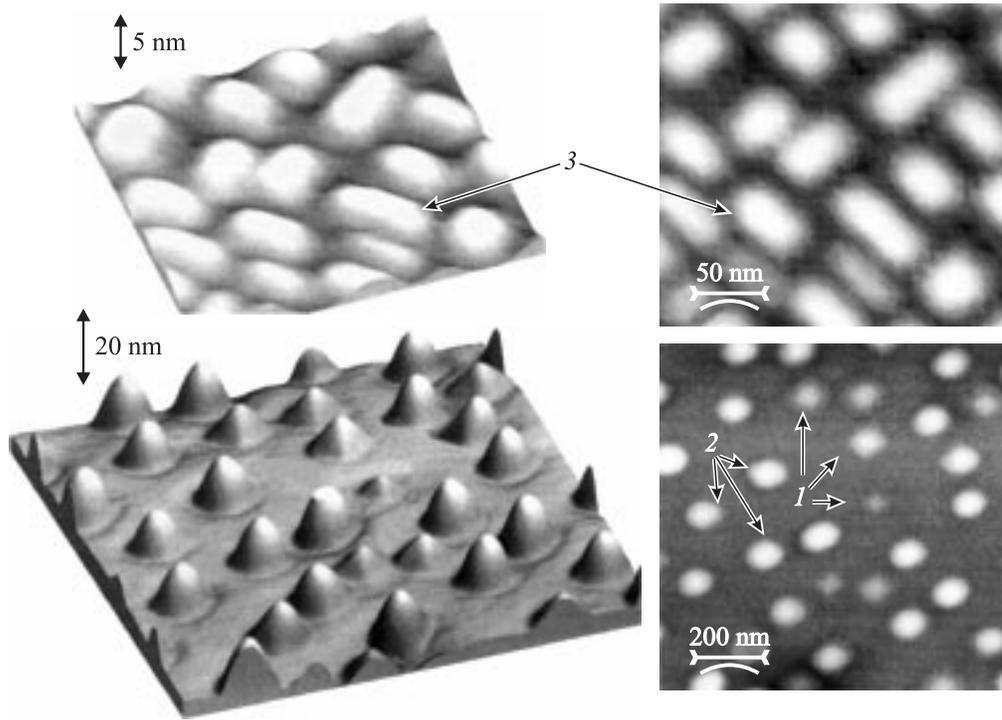


Рис. 1. АСМ-изображения наноостровков различной формы: 1 — пирамидальной, 2 — куполообразной, 3 — hut-cluster.

появление наклонных граней с общей площадью, большей чем площадь основания островка, сопровождается не просто исчезновением участков плоской поверхности осаждаемого материала, а участков смачивающего слоя, поверхностная энергия которого может быть сильно перенормирована за счет химических связей с подложкой, а также за счет зависимости поверхностной энергии от деформации. В частности, в работе [9] предполагается монотонное уменьшение поверхностной энергии Ge(105) от 66 до 60 мэВ/Å² с увеличением упругой деформации сжатия от 0 до 4%.

Выражение для полной энергии островка, согласно [4], записывается в виде

$$E = E_s + E_r, \quad (1)$$

где E_s — суммарное изменение энергии поверхности и интерфейса, вследствие формирования островка; E_r — изменение упругой энергии двумерного (2D) слоя вследствие его релаксации при 2D–3D переходе. Для наноостровков Ge, сформировавшихся на Si согласно механизма Странского–Крастанова, выражение для E_s имеет вид [4]

$$E_s = 2(s + t)(h\gamma_e \csc \theta - h\gamma_s \cotg \theta), \quad (2)$$

где γ_s, γ_e — энергия (на единицу площади) поверхности подложки и граней островка соответственно; s и t — латеральные размеры островка, h — его высота, θ — угол наклона боковой грани к основанию.

Энергия релаксации E_r , согласно [4], имеет следующий вид:

$$E_r = -2ch^2 \left[s \ln \left(\frac{te^{3/2}}{h \cotg \theta} \right) + t \ln \left(\frac{se^{3/2}}{h \cotg \theta} \right) \right]. \quad (3)$$

Здесь

$$c = \sigma_b^2 \frac{1 - \nu}{2\pi\mu},$$

где σ_b — xx - или yy -компоненты тензора напряжений германия, когерентно-сопряженного с кремниевой подложкой; ν и μ — коэффициент Пуассона и модуль сдвига кремниевой подложки соответственно. В данном приближении [4] пренебрегают энергией ребер островков, а также изменением величины σ_b с релаксацией напряжений при формировании островков.

Анализируя уравнения (1)–(3), можно сделать вывод, что полная энергия островка не может быть выражена как функция только объема, а является достаточно сложной функцией как латеральных размеров (s, t), высоты h , угла θ , так и физических параметров — объемного тензора напряжений σ_b и поверхностных энергий граней островка γ_e и подложки γ_s .

Следует отметить, что величины σ_b, γ_e и γ_s зависят от ряда факторов. При увеличении температуры роста, из-за интенсивной диффузии атомов Si из подложки возрастает их концентрация (x_{Si}) в островках [6,10]. Это уменьшает несоответствие постоянной решетки островка и подложки, а следовательно, и величину напряжений.

Зависимость σ_b от x_{Si} можно записать в виде

$$\sigma_b^x = \sigma_{b0}(1 - \alpha_c x_{Si}), \quad (4)$$

где σ_{b0} — напряжение в германиевом островке ($x_{Si} = 0$) на кремнии, коэффициент α_c в линейном приближении, использованном в этой работе, равен единице.

Существует еще один фактор, влияющий на величину механических напряжений, связанный с отличием линейных коэффициентов термического расширения наностроек Ge(SiGe) и подложки Si. Из термодинамики напряженной системы известно [11], что величина механического напряжения, возникающего в объемном материале вследствие изменения температуры от T_0 до T , равна

$$\sigma_T = -K\alpha_T(T - T_0),$$

где K — модуль всестороннего сжатия, α_T — коэффициент термического расширения материала. Коэффициенты α_T^{Ge} и α_T^{Si} зависят от температуры следующим образом [12]:

$$\begin{aligned} \alpha_T^{Ge}(T) &= 6.05 \cdot 10^{-6} + 3.6 \cdot 10^{-9}T - 0.35 \cdot 10^{-12}T^2, \\ \alpha_T^{Si}(T) &= 3.725 \cdot 10^{-6} \{1 - \exp[-5.88 \cdot 10^{-3}(T + 149.15)]\} \\ &\quad + 5.548 \cdot 10^{-4}T. \end{aligned}$$

Таким образом, при изменении температуры на величину $\Delta T = T - T_0$ в островках возникают дополнительные напряжения σ_b^T , обусловленные различием значений линейных коэффициентов термического расширения наностроек Ge (SiGe) и подложки Si:

$$\sigma_b^T = \sigma_T^{Ge} - \sigma_T^{Si} = (K^{Si}\alpha_T^{Si} - K^{Ge}\alpha_T^{Ge})(T - T_0). \quad (5)$$

Поскольку σ_b^T зависит также и от x_{Si} , то

$$\sigma_b^T = (K^{Si}\alpha_T^{Si} - K^{Ge}\alpha_T^{Ge})(T - T_0)(1 - \alpha_c x_{Si}). \quad (6)$$

Таким образом, выражение, определяющее величину механических напряжений в островках, на основании (4)–(6) имеет вид

$$\begin{aligned} \sigma_b &= \sigma_b^x + \sigma_b^T \\ &= [\sigma_{b0} + (K^{Si}\alpha_T^{Si} - K^{Ge}\alpha_T^{Ge})(T - T_0)](1 - \alpha_c x_{Si}). \end{aligned}$$

После преобразований получим

$$\sigma_b = \sigma_{b0} \left[1 + \beta_T \left(\frac{T}{T_0} - 1 \right) \right] (1 - \alpha_c x_{Si}),$$

где

$$\beta_T = \frac{(K^{Si}\alpha_T^{Si} - K^{Ge}\alpha_T^{Ge})T_0}{\sigma_{b0}}.$$

Влияние этих двух факторов — „температурного“ коэффициента β_T и концентрации кремния x_{Si} — в рассматриваемой области температур (20–750°C) на величину механического напряжения в германиевом островке противоположны по знаку. Поэтому величина

результатирующего напряжения σ_b зависит от того, какой из факторов преобладает.

Ранее в работе [13] нами был проведен численный анализ уравнения (1), приведенного к относительным единицам с помощью соотношений

$$\tilde{s} = \frac{s}{h}, \quad \tilde{t} = \frac{t}{h}, \quad \tilde{\gamma}_e = \frac{\gamma_e}{ch}, \quad \tilde{\gamma}_s = \frac{\gamma_s}{ch}:$$

$$\begin{aligned} E &= 2ch^3 \left\{ (\tilde{s} + \tilde{t})(\tilde{\gamma}_e \csc \theta - \tilde{\gamma}_s \operatorname{ctg} \theta) \right. \\ &\quad \left. - \left[\tilde{s} \ln \left(\frac{\tilde{t}}{\alpha \operatorname{ctg} \theta} \right) + \tilde{t} \ln \left(\frac{\tilde{s}}{\alpha \operatorname{ctg} \theta} \right) \right] \right\}, \quad (7) \end{aligned}$$

где $\alpha = \exp(-3/2)$. В приближении $x_{Si} = 0$, $\beta_T = 0$ было получено значение минимума полной энергии островка для некоторых значений γ_e и γ_s , близких между собой [13]. Отметим, что в использованной нами модели Терзофа [4,5] не учитывается энергия взаимодействия между островками. Естественно, что это приближение является адекватным только при не очень высокой поверхностной плотности островков, которая чаще реализуется при достаточно высоких температурах роста ($T \gtrsim 600^\circ\text{C}$). В общем же случае массивов близко расположенных островков энергия взаимодействия может быть существенной и должна учитываться при расчетах, например, в рамках модели, развитой в работах [1,14].

Кроме того, в теории Терзофа [4,5] и затем в численных расчетах, выполненных нами в работе [13], величины, характеризующие поверхностную энергию подложки γ_s и граней островка γ_e , предполагаются постоянными. Экспериментальные данные свидетельствуют о том, что островки формируются только с определенными углами наклона θ боковых граней к основанию островка [5,7]. Это значит, что в действительности γ_e зависит от θ . При этом необходимо учитывать физические принципы, которые реализуются в кристаллографии. Из принципа Гиббса–Кюри и закона Вульфа следует [15], что равновесная форма кристалла определяется не удельной полной энергией, а удельной свободной поверхностной энергией. Кроме того, боковыми гранями могут быть только определенные кристаллографические плоскости. Поэтому, чтобы сделать модель более приближенной к реальности, мы ввели угловую зависимость $\gamma_e(\theta)$:

$$\gamma_e(\theta) = \gamma_e \left[1 - \sum_j \frac{a_j \eta^2}{(\theta - \theta_j)^2 + \eta^2} \right], \quad (8)$$

где a_j, η — некоторые параметры, зависящие от кристаллографии кристалла.

С помощью выражения (8) мы выделили два дискретных значения θ_j , равных 11 и 26°, которые наблюдаются в экспериментах для германиевых островков с боковыми гранями (105) и (113) и соответствуют пирамидальной и куполообразной формам соответственно [6,8]. В этом

случае

$$a_1 = \frac{\Delta\gamma_e^{(105)}}{\gamma_e},$$

$$a_2 = \frac{\Delta\gamma_e^{(113)}}{\gamma_e}$$

— безразмерные величины, характеризующие понижение поверхностной энергии при формировании определенных боковых граней.

Зависимости полной энергии E островка (1) от угла θ с учетом формулы (8) и указанных выше значений θ_j (см. рис. 2) отличаются от аналогичных зависимостей в работе [13] присутствием введенных нами минимумов при $\theta_1 = 11^\circ$ и $\theta_2 = 26^\circ$. Следует отметить, что в качестве параметров в данной модели использованы не только известные (для объемных материалов) величины σ_{θ_0} , α , η , μ , но и определенный экспериментальным путем компонентный состав островков для различных температур роста [1,6,10–13,15,16]. В процессе вычислений проводилось варьирование величин γ_e и γ_s с целью обнаружения „широкого“ минимума в зависимости $E(\theta)$, который (см. [13]) охватывает достаточно широкую область значений θ .

3. Результаты и обсуждение

Как известно [7,10], наноструктуры Ge, сформированные при низких температурах эпитаксии ($300 \lesssim T_g \lesssim 500^\circ\text{C}$), если и содержат кремний, то в малом количестве ($< 10\%$), и имеют относительно малые размеры ($h < 10$ нм; $t, s < 100$ нм). В отсутствие значительной интердиффузии влияние температуры эпитаксии проявляется преимущественно в увеличении размеров островков с ростом T_g . На рис. 2 приведены зависимости энергии чисто германиевого островка (согласно уравнениям (1)–(3) с учетом (8)) от угла θ при его основании для различных латеральных размеров. Видно,

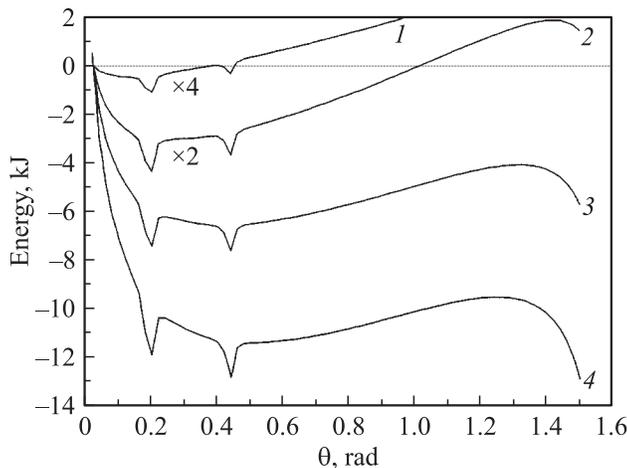


Рис. 2. Зависимости полной энергии E германиевого островка от угла θ при его основании для различных латеральных размеров t , нм: 1 — 20, 2 — 40, 3 — 60, 4 — 70.

что для выбранных размеров оба минимума, описываемые выражением (8), находятся в области отрицательных значений энергии, и, следовательно, обе формы островков являются устойчивыми. При малых размерах островков (рис. 2, кривые 1, 2) минимум, соответствующий пирамидальной форме ($\theta_1 = 11^\circ$), лежит на энергетической кривой несколько ниже, чем минимум для куполов ($\theta_2 = 26^\circ$), т.е. является энергетически более выгодным. Соответственно при этих размерах островки будут приобретать форму пирамиды. При увеличении размеров островков ход зависимости $E(\theta)$ изменяется таким образом, что при достижении определенного объема островков (рис. 2, кривые 3, 4) энергетически более выгодным становится минимум, соответствующий куполообразной форме. Такая тенденция качественно коррелирует с результатами экспериментальных исследований методами АСМ [8] и рентгеновской дифракции [16], в которых было показано, что действительно изначально островки формируются в одной из устойчивых форм — пирамидальной, однако при достижении некоторого критического объема они трансформируются в купола.

Значения поверхностной энергии граней германиевого островка, при которой в наших расчетах появляются „широкие“ минимумы в зависимости $E(\theta)$, составляют $\gamma_e \approx (1-2)$ Дж/м². Эти значения достаточно близки к рассчитанной из первых принципов в работе [9] величине поверхностной энергии Ge(105) — $\gamma_e \approx (0.96-1.1)$ Дж/м², а также для Ge(113) в работе [17]. Что касается поверхностной энергии Si(100), то ее значения, приведенные в литературе, лежат в диапазоне (1.0–2.4) Дж/м² [18] и также очень близки к значениям, которые использовались нами при построении зависимостей $E(\theta)$. Таким образом, имеет место качественная корреляция данной упрощенной модели как с экспериментом, так и с теоретическими расчетами, выполненными другими авторами.

Из экспериментов известно, что с увеличением температуры роста до $600 \lesssim T_g \lesssim 750^\circ\text{C}$ становится заметной интердиффузия, вызывающая увеличение содержания кремния в островках [6]. Этот факт, а также уменьшение поверхностной плотности островков приводят к существенному увеличению средних размеров островков (при неизменном количестве осажденного германия). Поскольку при заданной температуре роста концентрация атомов кремния в островках x_{Si} слабо зависит от количества осажденного германия [6], представляется целесообразным проанализировать изменение зависимости $E(\theta)$ от размера островка для данного x_{Si} , т.е. для фиксированной температуры роста.

На рис. 3 приведены такие зависимости для $T_g = 600^\circ\text{C}$ (а) и $T_g = 750^\circ\text{C}$ (б). Как видно из рис. 3, а, изменение зависимости $E(\theta)$ для $T_g = 600^\circ\text{C}$ ($x_{\text{Si}} = 0.25$, взято из эксперимента [6]) качественно аналогично случаю для чисто германиевых островков (рис. 2): при некотором размере островка минимум энергии, соответствующий куполам, становится энергетически более выгодным. Однако этот „критический“ размер островков

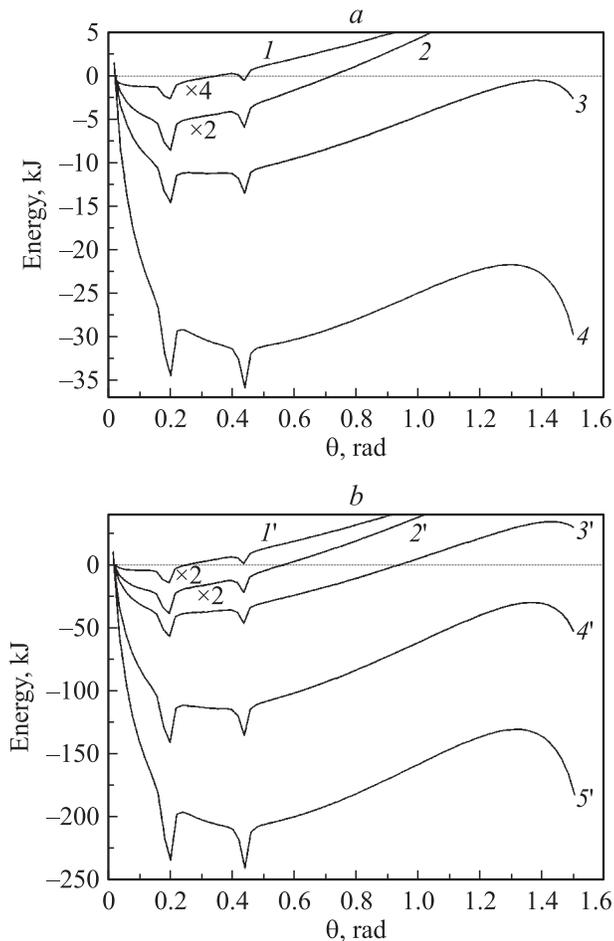


Рис. 3. Зависимости $E(\theta)$ от латеральных размеров t островков при T_g , °C: *a* — 600, *b* — 750. t , нм: 1 — 30, 2 — 60, 3 — 90, 4 — 120; 1' — 80, 2' — 140, 3' — 200, 4' — 270, 5' — 320.

в случае $T_g = 600^\circ\text{C}$ значительно больше, чем при низких T_g , когда островки не содержат кремния.

Аналогичная тенденция имеет место и при $T_g = 750^\circ\text{C}$ (рис. 3, *b*), когда, вследствие значительной интердиффузии, содержание кремния в островках уже превосходит содержание германия — $x_{\text{Si}} = 0.55$ [7]. При этом критический размер островков, соответствующий переходу пирамида–купол, возрастает еще более существенно. Такая тенденция полностью совпадает с наблюдаемым в эксперименте „затягиванием“ пирамид в область больших размеров при $T_g \geq 750^\circ\text{C}$ [6], когда доля островков, имеющих форму купола, незначительна даже для достаточно большего количества осажденного германия. Кроме того, наблюдалась также обратная трансформация куполов в пирамиды в процессе отжига при $T \geq T_g$ [19].

Полученные для данного температурного диапазона параметры γ_s и γ_e имеют значения, достаточно близкие к вычисленным в работах [9,17,18] для напряженных и релаксированных поверхностей Ge(105), Si(100), Ge(113), Si(113). Причиной небольшого различия этих значений может быть как приближенность нашего расчета, так

и отличие от реальных использованных нами параметров K , α , η и μ , для которых мы принимали значения, известные для объемных ненапряженных материалов, в то время как они могут быть модифицированы пространственным ограничением и неоднородными напряжениями в островках и в подложке.

Что касается формирования островков пирамидальной формы с боковыми гранями именно ориентации (105), то следует отметить наблюдаемую устойчивость данного типа граней именно в напряженном состоянии. Так, при осаждении германия на поверхность (105) кремния, двумерный рост германиевой пленки продолжается до 10 МС [20], в то время как на поверхности (100) трехмерные островки формируются уже при 3–5 МС [1]. Тот факт, что устойчивая поверхность объемного Ge(105) не наблюдалась, свидетельствует о ее стабильности именно в напряженном состоянии, включая Ge/Si(105) и *hut-klasters* Ge с гранями (105) на Si(001). При росте слоя SiGe на Si(100) [21] именно формирование (105)-граней из (100)-ступеней приводит к эффективной упругой релаксации такой структуры, а следовательно, к образованию и устойчивости *hut-klasters* на начальных стадиях роста. Как свидетельствуют экспериментальные данные [6,8], даже при заметной релаксации напряжений (до 20%) в пирамидальных островках ($T_g \approx 750^\circ\text{C}$), вызванной высоким (больше 50%) содержанием кремния, (105)-грань является стабильной. Этот факт может быть объяснен влиянием атомов кремния на поверхностную энергию грани.

Плоскость (113), преобладающая в куполообразных островках, как было показано в работе [22] для Si, также является термически устойчивой и ее свободная поверхностная энергия не намного больше, чем для плоскостей Si(100) и Si(111). Таковой, очевидно, является и поверхность (113) для Ge, поскольку при осаждении германия на Si(113) формируются достаточно плоские островки с усеченной вершиной, что еще раз подтверждает тот факт, что эта грань имеет относительно низкую поверхностную энергию. Отметим, что в данной работе рассмотрены только термодинамические аспекты, определяющие формирование островков и возможные их переходы из одной равновесной формы в другую. Однако, как было отмечено в работе [4] и более детально рассмотрено в [14], зарождение островков, их рост и механизм ограничения размеров могут определяться кинетическими эффектами, что требует отдельного рассмотрения. Не исключено, что при доминирующей роли этого фактора, если изменяются условия встраивания адатомов в разные участки наностроек, форма последних будет видоизменяться.

4. Заключение

Таким образом, в данной работе на основании численных расчетов показана возможность описания наблюдаемой в эксперименте трансформации самоиндуцирован-

ных наностроек Ge(SiGe) из одной формы в другую в зависимости от размеров островков и температуры эпитаксии. Используемая модель предусматривает наличие локальных минимумов поверхностной энергии островков, соответствующих определенным кристаллографическим плоскостям, определяющим ту или иную форму островка.

Авторы выражают признательность проф. З.Ф. Красильнику (Институт физики микроструктур РАН) за плодотворное сотрудничество.

Список литературы

- [1] Н.Н. Леденцов, В.М. Устинов, В.А. Шукин, П.С. Копьев, Ж.И. Алфёров, Д. Бимберг. ФТП, **32** (4), 385 (1998).
- [2] R. Szweda. III–Vs Review, **16**, 36 (2003).
- [3] F. Montalenti, P. Raiteri, D.B. Migas, H. von Kanel, A. Rastelli, C. Manzano, G. Costantini, U. Denker, O.G. Schmidt, K. Kern, Leo Miglio. Phys. Rev. Lett., **93**, 216 102 (2004).
- [4] J. Tersoff, R.M. Tromp. Phys. Rev. Lett., **70**, 2782 (1993).
- [5] J. Tersoff, F.K. LeGoues. Phys. Rev. Lett., **72**, 3570 (1994).
- [6] Z.F. Krasil'nik, P.M. Lytvyn, D.N. Lobanov, N. Mestres, A.V. Movikov, J. Pascual, M.Ya. Valakh, V.A. Yukhymchuk. Nanotechnology, **13**, 81 (2002).
- [7] М.Я. Валах, Р.Ю. Голиней, В.Н. Джуган, З.Ф. Красильник, О.С. Литвин, Д.Н. Лобанов, А.Г. Милехин, А.И. Никифоров, А.В. Новиков, О.П. Пчеляков, В.А. Юхимчук. ФТТ, **47** (1), 54 (2005).
- [8] S.A. Chaparro, Y. Zhang, J. Drucker, D. Chandrasekhar, D.J. Smith. J. Appl. Phys., **87**, 2245 (2000).
- [9] O.E. Shklyaeв, M.J. Beck, M. Asta, M.J. Miksis, P.W. Voorhees. Submitted to Phys. Rev. Lett.
- [10] U. Denker, H. Sigg, O.G. Schmidt. Appl. Surf. Sci., **224**, 127 (2004).
- [11] Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. *Теоретическая физика. Теория упругости* (М., Наука, 1965) т. VII, гл. I, с. 28.
- [12] D.D. Cannon, J. Liu, Y. Ishikawa, K. Wada, D.T. Danielson, S. Jongthammanurak, J. Michel, L.C. Kimmerling. Appl. Phys. Lett., **84**, 906 (2004).
- [13] А.М. Яремко, V.O. Yukhymchuk, M. Ya. Valakh, J. Pascual, A.V. Novikov, E.V. Mozdor, N. Mestres, P.M. Lytvyn, Z.F. Krasilnik, V.P. Klad'ko, V.M. Dzhagan. Mater. Sci. Eng. C, **23**, 1027 (2003).
- [14] V.A. Shchukin, D. Biernberg. Rev. Mod. Phys., **71** (4), 1125 (1999).
- [15] Б.Ф. Ормонт. *Введение в физическую химию и кристаллохимию полупроводников* (М., Высш. шк., 1982) гл. 3, с. 258.
- [16] A.I. Nikiforov, V.A. Cherepanov, O.P. Pchelyakov, A.V. Dvurechenskii, A.I. Yakimov. Thin Sol. Films, **380**, 158 (2000).
- [17] A. Laracuente, S.C. Erwin, L.J. Whitman. Phys. Rev. Lett., **81**, 5177 (1998).
- [18] A.A. Stekolnikov, J. Furthmuller, F. Bechstedt. Phys. Rev. B, **65**, 115 318 (2002).
- [19] Z.F. Krasil'nik, I.V. Dolgov, Yu.N. Drozdov, D.O. Filatov, S.A. Gusev, D.N. Lobanov, L.D. Moldavskaya, A.V. Novikov, V.V. Postnikov, N.V. Vostokov. Thin Sol. Films, **367**, 171 (2000).
- [20] M. Tomitori, K. Watanabe, M. Kobayashi, F. Iwawaki, O. Nishikawa. Surf. Sci., **301**, 214 (1994).

- [21] P. Sutter, P. Zahl, E. Sutter. Appl. Phys. Lett., **82** (20), 3454 (2003).
- [22] Jian-Hong Zhu, C. Miesner, K. Brunner, G. Abstreiter. Appl. Phys. Lett., **75** (16), 2395 (1999).

Редактор Т.А. Полянская

A correlation between the surface energy minima and the shape of self-induced SiGe nanoislands

A.M. Yaremko, M.Ya. Valakh, V.M. Dzhagan,
P.M. Lytvyn, V.A. Yukhymchuk

Lashkaryov Institute of Semiconductor Physics,
National Academy of Sciences of Ukraine,
03028 Kiev, Ukraine

Abstract Numerical calculations of the influence of composition, size and thermal expansion coefficients of self-induced Ge and SiGe nanoislands in silicon on their total energy are performed. The relation of the discrete surface energy minima of the island to its shape is considered. The interdiffusion effects are taken into account at high growth temperatures. The simulation results are compared with those obtained experimentally by using atomic force microscopy.